



高等学校教材

化工过程 开发与设计

张浩勤 章亚东 陈卫航 主编



化学工业出版社
教材出版中心

目 录

1.化工过程开发概论

1.1 科学技术及研究方法概述

1.1.1 科学理论对研究工作的指导作用

1.1.2 搜集事实材料的方法

1.1.3 思维加工方法

1.2 化工过程开发的内容

1.2.1 化学工业在人类社会的地位

1.2.2 化工过程开发的内容

1.3 化工过程开发的特点

1.3.1 实验室研究与工业生产的不同点

1.3.2 化工过程开发的特点

1.3.3 放大是化工过程开发的核心

1.4 化工过程开发的基本方法

1.4.1 实验研究方法

1.4.2 数学模型法

1.5 化工过程开发的主要步骤

1.5.1 开发基础研究

1.5.2 过程研究

1.5.3 工程研究

1.5.4 化工过程开发中的组织与管理

1.6 开发案例

1.6.1 合成氨发展史

1.6.2 包复肥的研究与开发

2.科学选题

2.1 选题基本原则

2.1.1 选题基本原则

2.1.2 项目及经费的主要来源

2.2 技术经济资料

2.2.1 文献调研

2.2.2 市场调研

2.2.3 资料的分析与整理

2.3 开发方案与立项报告

2.3.1 开发方案

2.3.2 立项报告

3. 绿色化学与技术

3.1 绿色化学及其特点

3.2 绿色化学原理

3.2.1 污染防止优于污染形成后的处理

3.2.2 最大限度地利用资源

3.2.3 最大限度地使用或产生无毒或毒性小的物质

3.2.4 设计化学产品时应尽量保持其功效而降低其毒性

3.2.5 尽量不用辅助剂而需要使用时应采用无毒物质

3.2.6 能量使用应最小并应考虑其对环境及经济的影响

3.2.7 最大限度地使用可更新原料

3.2.8 尽量避免不必要的衍生步骤

3.2.9 催化试剂优于化学计量试剂

3.2.10 化学品应设计成使用后容易降解为无害物质

3.2.11 分析方法应能实现在线监测并在有害物质形成前加以控制

3.2.12 化工过程物质的选择与使用应使化学事故的隐患最小

3.3 绿色化学的研究动向

3.3.1 氧化剂与催化剂

3.3.2 生物模拟多功能试剂

3.3.3 组合绿色化学

3.3.4 可同时防止与解决污染问题的化学技术

3.3.5 无溶剂反应与无溶剂分离技术

3.3.6 能源相关的研究

3.3.7 非共价键衍生物

3.3.8 无害介质水中的反应

3.3.9 超临界 CO₂ 作为绿色溶剂的利用

3.3.10 毒性与化学品设计中的计算机应用

3.3.11 可持续性分析

3.4 绿色化学技术

3.4.1 生物工程技术

3.4.2 等离子体技术

3.4.3 辐射加工技术

3.4.4 新型绿色催化技术

3.4.5 超临界流体技术

3.4.6 传统工艺中的新技术

3.5 清洁生产

3.5.1 清洁生产的定义

- 3.5.2 清洁生产的内容
- 3.5.3 清洁生产的特点
- 3.5.4 实施清洁生产的途径

4.实验室工作

4.1 实验工作中的文献资源

4.2.实验过程的观察与实验方法

4.2.1.观察

4.2.2.实验

4.2.3 实验分类

4.3 实验研究工作进行程序

4.4 实验研究的方法论

4.4.1 思想模型与理想实验方法

4.4.2 科学思维的逻辑方法

4.4.3 科学思维的非逻辑方法

4.4.4 创造性思维方法

4.4.5 数学方法

4.5 实验室安全技术

4.5.1 实验室常见事故的预防和处理

4.5.2 实验室安全用电

4.6 基础实验技术

4.6.1 常用玻璃仪器及其清洗干燥

4.6.2 加热与冷却

4.6.3 干燥

4.6.4 重结晶

4.6.5 升华

4.6.6 蒸馏

4.6.7 分馏

4.6.8 萃取

4.6.9 离子交换分离法

4.6.10 膜分离

4.6.11 色 谱 法

4.6.12 红外光谱

4.6.13 核磁共振谱

4.6.14 催化剂反应性能的测试方法

4.6.15 X 射线衍射技术

4.6.16 热分析技术

4.6.17 电子显微镜法

4.6.18 电子能谱法

4.6.19 常用测量技术

4.7 实验优选和实验数据处理

4.7.1 单因素实验优选

4.7.2 正交试验设计法

4.7.3 均匀试验设计

5.化工过程放大

5.1 反应过程放大基本方法

5.1.1 基本概念

5.1.2 反应过程放大基本方法

5.2 传递过程与冷模试验

5.2.1 传递过程

5.2.2 冷模实验

5.3 化学反应器

5.3.1 化学反应器基本概念

5.3.2 化学反应器选型

5.4 中间试验

5.4.1 中间试验的目的和作用

5.4.2 中间试验分类

5.4.3 中间试验要注意的几个问题

6 工程经济

6.1 评价的基本内容、方法和步骤

6.1.1 评价的基本内容

6.1.2 评价的方法和步骤

6.2 项目的投资估算

6.2.1 工艺装置投资 (C_{BL}) 估算

6.2.2 公用工程及罐区投资 (UTI) 估算

6.2.3 其它工程费用估算

6.2.4 联合试运转费和未可预见费

6.2.5 流动资金估算

6.3 产品成本估算

6.3.1 产品成本组成

6.3.2 固定成本和可变成本

6.3.3 设备折旧

6.3.4 成本估算方法

6.4 经济评价要点

6.4.1 经济评价中的主要概念

6.4.2 经济评价要点

6.5 技术经济评价报告

6.5.1 简介

6.5.2 项目说明

6.5.3 技术经济分析

6.5.4 工业化预测

6.5.5 开发研究经费预算

6.5.6 评价结论

7.安全与环保

7.1 劳动安全

7.1.1. 劳动安全及其设计内容

7.1.2. 化学危险品及其分类

7.1.3. 化工防火防爆及设计要点

7.1.4. 化工防毒和防烧伤及设计要点

7.2. 环境保护

7.2.1. 化工环境保护设计的内容

7.2.2. 环境影响评价及其功能与程序

7.2.3. 环境影响评价报告书

7.2.4. 三废治理及噪声控制

8.过程分析与合成

8.1 单元操作的知识过程分析

8.1.1 物料输送、混合、粉碎的方法

8.1.2 改变物料温度的方法

8.1.3 非均相混合物分离方法

8.1.4. 均相混合物分离方法

8.2 分析与综合

8.2.1 分析与综合的基本概念

8.2.2 比较方案筛选

8.3 化工过程合成

8.3.1 探试法

8.3.2 形态分析——分枝界限法

8.3.3 功能分析——调优法

8.3.4 计算机辅助过程合成

8.4 化工过程合成案例——苯乙烯生产

8.4.1 生产方法

- 8.4.2 乙苯的生产
- 8.4.3 乙苯脱氢制苯乙烯分析
- 8.4.4 工业乙苯脱氢

9. 工艺设计基础

9.1 过程开发设计

- 9.1.1 概念设计
- 9.1.2 中试设计
- 9.1.3 基础设计

9.2. 化工工艺设计基础

- 9.2.1 可行性研究报告
- 9.2.2 初步设计
- 9.2.3 流程图规范要点
- 9.2.4 施工图设计

9.3. 化工过程计算基础

- 9.3.1 物料衡算
- 9.3.2. 能量衡算

10. 知识产权保护

10.1 知识产权

- 10.1.1 知识产权的保护范围
- 10.1.2 侵犯知识产权行为的基本特征
- 10.1.3 侵犯知识产权行为的法律救济

10.2 技术成果

- 10.2.1 技术成果认定的范围与形式
- 10.2.2 技术成果认定的程序

10.3 专利

- 10.3.1 专利权
- 10.3.2 专利
- 10.3.3 如何申请专利
- 10.3.4 专利文献的使用

10.4 技术转让与技术合同

- 10.4.1 技术合同及其分类
- 10.4.2 技术合同的内容
- 10.4.3 技术合同的签订

10.4.4 技术合同的履行

10.4.5 签订和履行技术合同时应注意的问题

内容提要：

化工过程开发是从一个化学新产品、新工艺概念的形成，通过实验室研究、中试放大、工艺设计、技术经济评价等环节，直至付诸工业化的全部过程，是范围极广的一门综合性工程技术课程。本书着重介绍化工过程开发中涉及的共同性问题，即化工过程开发的基本理念、科学选题、实验室研究、过程放大、工程经济、安全与环保、过程分析与合成、知识产权保护等内容，并介绍了一些表述开发结果所涉及的工艺设计方面的基本知识。化学工业对人类生存环境有重要的影响，绿色化学技术的介绍，以开阔眼界，拓展思路。

本书为化学工艺及相关专业本科学学生教材，亦可作为化工、材料、环境、轻工、冶金等专业的工程技术人员、研究人员及教师的参考用书。

前 言

化学工业是国民经济的重要支柱产业之一，与人类衣食住行密切相关，对解决人类社会所面临的人口、资源、能源、环境等可持续发展的重大问题有重要作用。化学工业具有原料、工艺、产品多方案的基本特征，即同一原料经过不同的加工工艺可得到不同的产品；同一原料经过不同的加工工艺可得到相同的产品；不同原料经过不同的加工工艺可得到相同的产品等。化学工业的技术方案与社会效益、经济效益 and 环境保护密切相关，研究与开发是技术创新与进步的必由之路。

化工过程开发是从一个化学新产品、新工艺概念的形成，通过实验室研究、中试放大、工艺设计、技术经济评价等环节，直至付诸工业化的全部过程，是范围极广的一门综合性工程技术课程。本书的**目的**在于让学生更好的了解从实验室到工业化的全过程，使学生具有进行工程实践的基本方法和技能，为毕业设计奠定基础，为进入社会做好准备。

化工过程开发涉及的内容十分广泛，在有限的文字中要做出全面、准确的介绍是困难的，编者在内容组织上颇费了许多心血，参考了许多书籍，吸收了其精华部分，在此表示感谢。本书着重介绍化工过程开发中涉及的共同性问题，即化工过程开发的基本概念、科学选题、实验室研究、过程放大、工程经济、安全与环保、过程分析与合成、知识产权保护等内容，并简要介绍表述开发结果所必然涉及的工艺设计的基本知识。化学工业对人类生存环境有重要的影响，绿色化学原理与技术的介绍，以开阔眼界，拓展思路。

本书面向化学工艺及相关专业的**学生**，内容选材上体现工科教育的特点，突出研究工作的实际需要，注重科学研究方法论教学，注重化工前沿与交叉学科知识介绍，理论联系实际，培养实际技能，加强工程观点、技术经济观点和安全与环保意识，重在培养有创新意识的工程技术人才。教材内容在化工原理和反应工程的基础上撰写，为避免与所学过的内容重复，有关内容书中未详述，列出了主要参考书，供读者进一步查阅或学习使用。文字表述深入浅出，各章配有小结和习题或思考。通过本书的学习，应能拓宽学生的知识面，提高毕业设计、毕业论文的质量，更重要的是将所学知

识与化工生产实际和市场需要结合起来，交叉渗透，树立创新意识，培养创新思维方法，提高服务社会的能力。

本书由郑州大学、河南大学、郑州轻工业学院联合编写。张浩勤任主编，负责审稿和定稿，章亚东、陈卫航任副主编。具体内容的编写分工如下：张浩勤编写第 1 章、第 5 章；章亚东编写第 3 章、第 4 章；陈卫航编写第 2 章、第 5 章；刘亚莉编写第 7 章、第 9 章；马新起编写第 6 章、第 10 章。

受水平所限，错误和片面性在所难免，敬请广大读者和同行专家批评指正。

编者

2002.3

1 化工过程开发概论

开发具有开拓、发展、扩张的含义。它是指研制新产品，开拓新方法，发展现有过程，扩大应用领域。化工过程开发是指从实验室研究成果（新产品、新工艺等）过渡到实现工业化的科学技术活动。由于化工过程开发涉及化学工艺、化学工程、机械设备、调节控制，材料与防腐，技术经济等各个领域，同时还包括实验、设计和试生产等各个环节，因此它是范围极广的一门综合性工程技术。

近代的化工产品是日新月异的，新技术、新工艺和新设备也在不断涌现。每年大批的成果为实验室技术，而能实现工业化的却只是很少一部分，缺少开发人才是重要原因之一。因此，如何缩短从实验室成果过渡到工业化的开发周期，是有重大意义的，归根到底，应大力培养具有工程开发能力的人才。

1.1 科学技术研究方法概述

“经济建设要依靠科学技术，科学技术要面向经济建设”。“科学技术是第一生产力”。科学技术的定义是什么？科学与技术如何界定？这些问题看似简单，但实难回答，因为至今它们并无公认的定义。引用辞海的解释，科学是关于自然、社会和思维的知识体系。科学（Science）的任务是揭示事物发展的客观规律，探求客观真理，作为人们改造世界的指南。技术(Technology)指根据自然科学原理和生产实践经验发展成的各种工艺操作方法和技能。科学是发现，技术是发明；科学是创造知识的研究，技术是综合利用知识满足实际需要的研究；科学是认识、改造世界的原动力，技术是改造世界的手段。科学与技术是辨证的统一体。

研究（Research）意指钻研，推究，含义是反复探索；开发(Development)是开拓、发展、扩张的意思。科学研究(R&D)包含了研究与开发的内容，是创造和运用知识的探索工作。科学研究分为基础研究、应用研究、和技术开发研究。化工过程开发属于技术开发研究的范畴。

方法(Method)指解决思想、说话、行动等问题的程序、门路、途径等。在科学研究中，方法表示认识的途径，解决问题的手段、工具以及操作的程序。适当的方法是研究者取得成功的钥匙，是提高认知水平的阶梯。好的方法使“事半功倍”，差的方法则可能“事倍功半”，甚至一事无成。对一相同的科学研究问题，不同的研究者，不同的历史时期，采用的方法未必相同，正因为多种研究方法的竞争，才促进科学技术的不断进步。掌握方法比学会知识更重要。遗憾的是方法没有固定的模式，没有人能明确的告诉你必然能走向成功的方法。但是，随着科技的进步，科学研究方法论也日臻成熟，了解科学研究方法论并在其指导下进行科研工作即可“事半功倍”。

1.1.1 科学理论对研究工作的指导作用

创造起源于观察，创造者必须对创造活动的对象进行观察，包括对其发展历史、研究现状进行分析，力求了解存在的问题、问题的性质、解决问题可能的途径。这里

的“问题”是对现有的产品、工艺的不满意或不满足，发现问题从而产生创造的欲望，即形成一种“概念”，以确立研究的课题。课题确立，目标确定，接下来就是寻求实现目标的途径，也就是寻求解决问题的方法。任何研究过程都必须在科学理论的指导下进行。图 1-1 给出科学研究方法论框图。

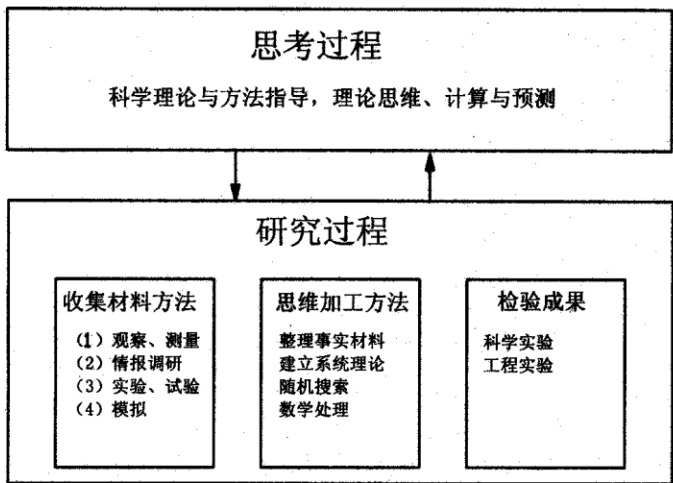


图1-1 科学研究方法论框图

图 1-1 表明科学的研究方法是科学理论和方法论指导下的思考过程和实际研究过程的交替进行。科学理论是指哲学、政治经济学、自然辩证法的有关理论。就方法论而言，20 世纪几乎同时诞生了几门崭新的学科，即系统论、信息论和控制论。它们从不同的侧面揭示了客观物质世界的本质联系和运动规律，为现代科技的发展提供了新得概念和方法。以“三论”为基础，建立了系统科学体系，应用现代数学和计算机等工具，对系统的构成要素、组织结构、信息交换、自动控制等功能进行分析与研究，达到最优设计、最优控制、最优管理的目标。

科学理论与方法论始终处于指导地位，研究过程必须在科学理论与方法论的指导下进行。搜集事实材料、思维加工和检验成果是科研活动的三个主要阶段，图中表明了其顺序关系。特别注意：上位图中思考的是全局问题，下位图中的思维加工指本课程可能采用的处理方法，思考的是局部问题。

人们总是从认识事物的特殊性开始，最终才掌握本质和规律的。但开题之初并不了解研究对象有哪些特殊性，所以要按照图 1-1 的方法搜集大量的事实材料，查阅文献与调研，力图从中得到启迪；收集务求全面、整理尽量详细，作为分析研究、推理判断的依据，特别要防止在完成研究时才发现他人在许久之前已有成果报道。

课题分解与实验规划是实验开始之前的一个重要环节，属于思考过程的内容。系统论认为课题是由诸多层次组成，而每个层又包含有很多单元。通常以原理、性质、行为、结构、形态等为准把复杂的课题分解成一些简单课题(子课题)，把整体分解成若干局部。课题分解有利于分工合作或者逐步解决困难，获得深入、细致、清晰的

认识。注意到单元、层次相互之间的有机结合，最终获得对整体规律的认识。相反，不分青红皂白，“黑箱式”的整体研究，只能得到笼统的、粗糙的、模糊的认识。

初步形成方案后，进入研究过程的实验阶段(如无需实验的课题，则进入思维加工阶段)。由于种种原因，课题分解不会一次成功，要根据实验信息修改初步分解方案。研究进程在实验阶段与思考过程之间经过多次反复，认识也逐渐由浅入深地发展。

实验设计，即确定实验点的位置与数量。目前的实验设计方法有析因实验设计与序贯实验设计（见第 4 章）。取得一定实验数据后，研究过程进入思维加工阶段，例如在其中进行数学模型判断(识别)和参数估算。研究过程转入上位的思考过程，对结果进行判别后，又回到实验阶段。思考过程与研究过程之间的反复循环，直至取得最终成果。上述的多次循环类似于数学上的反复迭代。实验是费时耗资甚巨的，而思考过程主要发生在研究者的脑海之中，经济代价极小。因此，强化思考过程在科研中的主导性和有效性是省时节资的主要途径。

1.1.2 搜集材料方法

直接搜集材料的基本形式有观察法、测量法、实验法和模拟法等。

1.1.2.1 观察法

观察法是人们通过感官，有计划、有目的对自然发生状态下和人为条件下的事物进行的定性、定量、直接或间接详细考察。观察在天文学、粒子物理等超大与超微领域中有着特别重要的意义。虽然观察只能获得事物的外部特征，但这在研究工作中几乎是无法逾越和无法取代的，科学始于观察，原因也许在此。

1.1.2.2 测量法

测量是量化信息的手段，没有测量，就没有科学。研究者应掌握分析化学有关知识，既要熟悉温度、压强、流量、液位等工程参数的测量方法，也要熟悉现代测试仪器。例如：原子吸收分光光度计，可测试 70 余种金属元素含量；紫外及可见光分光光度计，用于有机化合物分析和检测、同分异构体鉴别、物质结构测定；红外吸收光谱，确定有机化合物或官能团的结构等。

1.1.2.3 实验法

实验指人为的利用仪器、设备，创造特定的环境与条件，为认识事物的本质和规律营造前提和提供可能。通过合理的安排，可以将复杂的研究对象分解到层次、割裂成单元逐一进行研究；实验可以在极端的条件下进行，发现一些奇异的现象并揭示出事物本质规律，是人们获取新知识、新技术的重要方法，超临界萃取就是其中一例。改变实验条件，控制研究对象，加速或延缓过程的进行，可获得需要的数据，催化剂寿命评价实验是典型的例子。

1.1.2.4 模拟法

模拟是对难以进行直接研究的对象（火箭，小浪底大坝等）开展的间接研究。模拟分为物理模拟和数学模拟。数学模拟的核心是建立能够反映对象本质（或某一方面性质）的数学模型。数学模型常来源于对物理现象深入的分析和适当的简化，往往需要用实验进行验证（详见第 5 章）。

1.1.3 思维加工方法

科技的发展中，已创立了大量的思维加工方法。整理事实材料可以采用分析方法、分类方法、归纳方法、比较方法等；建立系统理论可采用演绎方法、综合方法等；随机搜索性思维方法主要有科学想象、直觉思维、类比方法以及理想化等方法。

这里有两个问题值得重视，其一是事实材料或具体的实验数据一定要准确、可靠，它们是思维加工的基础。如果仅有数量有限的宏观数据，例如温度、压力、流量、组成，只能得到一般的认识，通过回归以经验公式告终。也许这些成果有工程价值，但难于达到理论上深层次地突破。其二，用好已有的数据，获得与数据层次相应的认识水平，取决于方法论与科学理论水平。也就是说，既不能超越数据层次(宏观、微观)追求不切实际的认识深度，也不能不加分析，停留在表面上，对本应有的认识深度视而不见。数据是“表”，是内在质的综合表现，要“由表及里”的认识本质，分析是有效的方法。分析后的综合则是认知水平的升华。教材第 8 章将深入讨论分析与综合方法在过程开发中的应用。

1.2 化工过程开发的内容

1.2.1 化学工业在人类社会中的地位

凡是运用化学方法改变物质组成、结构，合成新物质的生产过程和技术，称为**化学工艺 (Chemical Technology)**。运用化学工艺生产化学品的产业部门，即**化学工业 (Chemical Industry)**。研究化学工业生产过程中的共同规律，解决规模放大、设计和生产操作的科学，称为**化学工程 (Chemical Engineering)**。化学工程包括：传递过程(特别是流体力学)、化工热力学、化学反应工程、过程工程和过程系统工程五个分支。在现代汉语中，化学工艺、化学工业和化学工程都简称为**化工**。

化工涉及国民经济、国防建设、资源开发和人类衣食住行的各个方面，对解决人类社会所面临的人口、资源、能源和环境可持续发展的重大问题，也起到十分重要的作用。化工是工业革命的助手、农业发展的支柱、战胜疾病的武器，改善生活的手段。化工是国民经济的支柱产业之一。

化学工业的任务，主要在于发展满足于国民经济各部门所需的化工新产品，同时化学工业本身需要不断的完善和发展。对老产品的工艺生产方法进行改造，高效催化的开发、新型分离技术的应用、节能设备的开发等都需从实验室研究开始，逐步过度到工业化装置。目前，化学工业蒸蒸日上，化工过程开发任重道远。表 1-1 简要的列出化工产品在经济各个领域中的应用。

表 1-1 化工产品在其他领域的应用

领域	所需化工产品
农业	农药、化肥、薄膜、饲料、生长激素等
能源	能源物质开采与加工，太阳能转化，燃料电池等
交通	燃料、涂料、结构材料、润滑剂等

建筑	建筑材料、装饰材料、水泥改性等
制造	工程塑料、复合材料、陶瓷材料等
纺织	化学纤维、染整剂等
日用品	洗涤剂、化妆品、天然物质加工、表面活性剂等
医药	药品合成、医用材料、DNA 技术等
环境	三废治理、降解材料、清洁生产技术等
信息	各种功能材料、纳米技术等

1.2.2 化工过程开发的内容

在化工生产中，从原料到产品，物流经过了一系列物理和化学加工处理步骤，人们称这一系列加工处理步骤为化工过程（**Chemical Technological process**）。化工过程是围绕核心(主要)反应器组织的，其上游为原料(反应物)的前处理，以满足主要化学反应工艺条件为目标；下游为产品(生成物)的后处理，通过分离、纯化等手段，以达到产品标准为目标。除主要化学反应器外，化工过程主要由进行物理过程的单元操作(输送、加热，冷却、分离等)和进行化学过程的单元过程(化学法净化、氧化、加氢，硝化、磷化等)组成，有时也将生化处理引入化工过程，例如脱硫或废水处理。

化工过程研究与开发是指从一个有关新产品、新技术或新工艺的概念的形成，到科研、设计、建设工厂，从实验室研究成功地过渡到第一套工业规模生产装置，付诸实施的全部过程。

化工过程研究与开发的目的为：①**产品开发**，即开拓满足国民经济需要的新产品；②**工艺过程开发**，包括创造已有产品的新生产工艺和开发实用于新产品的新工艺；③**工艺改进**，对现有设备进行改造，达到提高产品质量、节约能耗、减少环境污染等目的；④**应用开发**，为现有产品寻找新的用途，延长产品寿命，使其持续赢利。

研究包括基础研究（含应用基础研究）和工程技术研究二个阶段。

基础研究以发现物质世界的规律为目标，核心是高水平的理论创新，包括新的化合物、新的化学反应、新的合成方法等，不强调特定的商业目的。基础研究的成果往往孕育了新发现、新理论、新规律与定律，其表现形式是学术论文或学术著作的推出。在化工领域中，主要研究物理过程和化学过程的基本规律，国家鼓励的研究领域主要有：化工热力学；界面现象与传递过程；新型分离技术；化学反应工程；生物工程和绿色化工等。

工程技术研究的结果是将实验室的研究成果转化为第一套工业装置，表现形式是研究报告、论文、专利、图纸以及装置，设备，产品等。化工过程开发(**Development of Chemical Technological Process**)属于工程技术研究阶段。化工过程开发的**基本内容**为：根据基础理论研究的成果和有关工程资料，按照科学的方法，寻求技术可靠、经济合理的途径来制备该化学品，然后进行扩大试验，评价过程的可行性，设计工业装置——实现工业化。

在化学领域中，20 世纪世界新合成的化合物累积已在 2000 万种左右。合成新化

化合物的数量，目前正在呈指数级速度增加，Chemical Abstract 的卷册逐年剧增，就是明证。然而，这 2000 万种左右的化合物中，具有应用价值的仅约占 1%，真正形成工业产品的则更少。

近年来我国每年登记取得 3 万多项科技成果(已不是单纯的理论论文)，形成产业并取得经济效益的只有 5%。科技部负责人认为我国目前科技转化率低下有两方面的原因：一是技术不成熟，直接可以拿来应用的技术不多；二是科学研究及技术开发与市场需求脱节，实验室成果到工业规模生产之间的桥梁并没有架通。显然，这座桥梁就是过程开发研究。

1.3 化工过程开发的特点

过程是指相互关联的一系列活动或者变化，是事物的发展，是事情经历的经过。过程内在的科学规律，是客观存在的，只不过在以前尚未被认识。所谓开发，宛如照片的显影，是指对过去未能利用的东西加以利用。

化学工艺是化工过程的精髓。开发一个化工过程，就是一种化学工艺的形成过程，包括生产的原料路线，生产方法、技术、操作程序、物料走向，以及相关单元操作设备的某种组合。化学工艺决策对能否进行正常生产以及能否取得效益，至关重要。在工程设计中，设备的失误局部的，而工艺的失误则是全局的。所以，针对化工过程的特点进行开发是十分必要的。

1.3.1 实验室研究与工业生产的不同点

化工过程开发的成果，首先是在实验室完成的。无论是合成一种新的化合物、从大量配方中筛选到一种最佳配方，还是提出一种新的生产方法、改造一台生产设备，都需要在实验室中对多种可能的方案进行比较实验，确定其中最优的方案。但是，这种实验室的研究结果，只能说明该方案的可能性，还不能直接用于工业设计。原因在于实验室研究与工业生产有许多重大的不同之处。

(1) 原料来源的影响。在实验室研究中，常常采用化学纯 (Chemically Pure)、甚至分析纯级试剂 (Analysis Reagent) 为原料，其中杂质受到较严格的控制。在工业生产中，工业级原料中混入的微量杂质可能造成催化剂中毒、催化副反应、造成结晶形状、性质的改变。因此，在开发研究的深入阶段，必须采用廉价的工业原料进行重复实验，以考察过程的可靠性和技术经济性。为考察原料中杂质带来的影响及影响的程度，可采用向试剂级原料中逐项添加杂质的方法进行系统的研究。当杂质的影响显著时，要研究可靠的净化工艺。

(2) 杂质的积累。化学实验常采用玻璃仪器进行，腐蚀较少。工业生产在金属或非金属材料中进行，材料腐蚀对过程的影响不可小视。在连续生产中，杂质的积累到一定程度，就会产生质的变化。副反应的产物也可视为系统中的杂质，过程开发中就要考虑杂质的分离方法，并采取措施减少杂质积累的影响。

五水偏硅酸钠是一种环保型洗涤助剂。其基础理论研究进行较早，20 世纪 30 年代已绘制了各种温度下的结晶相图。由于原料中夹带的铁离子、氯离子会引起晶形的

改变，铁离子的存在会促使产品中氯离子含量的提高，所以，过程开发要解决的重要问题之一是掌握杂质积累情况和影响规律，寻找杂质脱出方法以实现结晶母液的再循环。

(3) 传递规律变化。实验室中设备规模较小，物料流动状态接近于与理想状态。设备规模放大后，流动状态变化导致过程传递规律的变化，对单元操作设备和化学反应器的影响都是巨大的。

化学反应器中传热现象就是一例。实验室小型设备具有较大的比表面积，且直径小，即使是放热反应，热量很容易通过表面传导或辐射等形式导出，常常需要外加热量来维持反应所需的温度。设备增大后，参加反应物质的体积增大，故反应热不易只靠反应器表面导出。因此，小试中还需加热的放热反应，到中试和工业生产时，可能需采取适当的措施除去热量。如果解决不当，反应热不能及时移出，会产生“飞温”，使反应失控，甚至有发生爆炸的危险。

实验室研究的结果，只能说明该过程方法的可能性，但还不足以用来设计生产装置。过程开发的任务是要使实验室的研究结果能变为工业生产的现实。实验室研究和过程开发是相互衔接的。一般讲，实验室研究以得到一种生产方法的“设想”而告终，过程开发则要对这种生产方法的“设想”在技术上和经济上的可能性和合理性进行考核。为了进行试验而所需的模型装置或中试装置的设计、安装和开车均应直接包括在过程开发阶段中。

1.3.2 化工过程开发的特点

(1) 原料、生产方法和产品的多样性和化工开发的多方案性。化学工业可从不同的原料出发制造同一产品；也可用同一原料制造许多不同产品；同一原料制造同一产品还可采用许多不同的生产路线。一个产品有不同的用途，而不同产品有时却可有同一用途。一种产品往往又是生产别种产品的原料、辅助材料或中间体。这些关系错综复杂，因原料来源、技术、设备和市场等方面的变化，既要互相适应，又可以有很大的选择余地。

化工过程开发中多方案性还表现在同一催化剂可催化不同的反应；完成同一反应可使用的反应器形式有很多种；杂质脱除、分离纯化都有许多种方法可供选择；各种单元操作组合时的位置也灵活可变。

上述的多方案性使得化工过程开发工作既充满魅力，又极具挑战性。举例如下：
煤、石油、天然气都可作为合成氨的原料。

以苯为原料，通过磺化可制成苯磺酸；通过硝化可制成硝基苯；通过氯化可制成氯苯。以苯磺酸、硝基苯、氯苯作为中间体，又可制造出大量的化学品。

在以石英沙为原料制备硅酸钠的过程中，有干法和湿法两种流程。以硅酸钠和烧碱为原料可以制备出偏硅酸钠、正硅酸钠、倍半硅酸钠等。就五水偏硅酸钠的制备来说，有①溶液结晶法；②结晶粉碎法；③一次造粒法等几种方法。溶液结晶法由于工艺简单，设备投资较小，产品质量高，为国内多数厂家所采用，但分离后有大量母液需要回收(循环使用)；一次造粒法是国外最先进的制造技术，可用计算机控制进行连

续生产，一次投资很大，对原料中杂质含量要求相当严格。

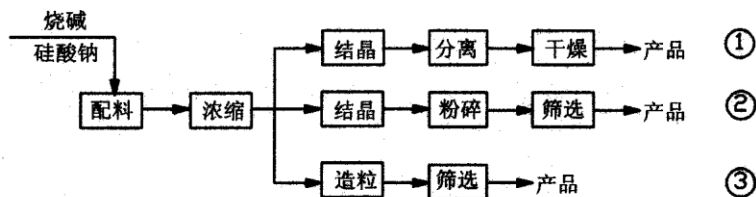


图1-2 五水偏硅酸钠工艺流程示意图

(2) 化工过程开发要十分重视能量和资源的充分利用。化学反应伴随着能量的变化，在生产过程中或是吸热反应或是放热反应。化工生产耗能较多，因而节能潜力大。例如，换热器的设计，过去曾强调减少传热面积以减少投资；现在为了有效利用能源，即使增加投资，也要尽可能地减少传热温差，尽可能地提高能量利用效率。

化学工业的资源主要有：①矿物原料：煤、石油、天然气、磷矿、各种金属矿等；②生物原料：粮食、玉米杆、麦杆类农业废料、林业中木材加工副产物、相关生物质等；③水、（含海水、盐湖水等）和空气。

石油工业的发展是 20 世纪社会取得飞速发展的重要原因之一。应当指出：矿物原料是消耗性资源，地球上煤、石油的储量是有限的。能源危机已不仅是危言耸听，而是实实在在的威胁。由于光合作用，许多生物原料却年年生长，属于可再生资源。显然，可再生资源的开发利用将是 21 世纪化工发展的重要方向。

(3) 环境保护和过程安全是化工过程开发中必需重视的问题。环境污染，影响了人民健康，危害了生态平衡，例如：美国联合碳化物公司在印度博帕尔市的农药厂 1984 年 12 月因毒气泄漏事故，造成 2 000 人中毒死亡；日本因汞中毒造成水俣病，也曾是举世瞩目的化学工业恶性污染事件。各国为了防止污染，相继制定了环境保护法，对化学工厂的原料贮运，生产过程中产生的废气、废液、废渣，以及对跑、冒，滴、漏现象的处理，产品的包装和储运，都相继规定了严格的技术规程和标准。现代化工生产，要求把副产品、甚至废弃物都进行利用。近几年绿色化学与化工提出原子经济反应概念（见第 3 章）就是为了解决这个问题。化工过程常含有易燃、易爆和有毒物质，安全问题要特别重视。

(4) 在化工过程开发中，技术经济观点是十分重要的。技术是为经济服务的，技术上先进必须在经济效益中体现出来，一般讲，没有经济效益的项目是没有开发价值的。例如，1973 年用膜分离技术将海水淡化制成饮用水在技术上已基本成熟，美国军方在 1979 年完成了野战所需的水处理装置的设计。但是，淡化海水的成本过高使其迟迟难以大工业化，就国内而言，1996 年才利用膜分离技术建成广东石化大亚湾海水淡化工程。

必须指出：经济观点是重要的，但决不是唯一的判据，因为有许多其它因素是难以用经济来表示的，例如：

- ① 产品对资源的利用程度如何；能否采用可再生资源代替消耗性资源；
- ② 产品使用性能是否优于其他方法生产的产品；在使用功能终结时是否对环境无害；
- ③装置的噪音、热量的扩散，过程中“三废”的排放等对周围环境有无破坏作用；
- ④生产过程危险性如何（包括爆炸、火灾、危险品泄露等），对操作人员的健康有无危害。

因此，在过程开发时必须同时对技术、经济、环境、安全、资源等一系列问题作综合的考虑，必须考虑社会效益。

1.3.3 放大是化工过程开发的核心

当前化学工业的迅速发展，首先在于化学这门科学的不断创新，以及采用了新型的材料和先进的机械装备。但是，就化工过程本身而论，主要取决于“化学工程”的发展。在过程开发时，不再全凭经验，自觉地运用化学工程的理论和方法，可以大大缩短了工业化的周期，加速化学工业的发展。

在化学工程的发展史上，二十世纪初“单元操作”概念的提出对化工过程开发具有重要的意义。对单元操作的深入研究，传递过程（动量传递、热量传递、质量传递）理论的发展，初步建立了化工参数间简单的定量关系，使工程技术人员能有效的进行单元操作装置的选型、设计和操作。二十世纪后期“化学反应工程”理论的发展与逐渐成熟，化学反应宏观动力学模型的建立，为化学工业的心脏---化学反应器的放大奠定了基础。

化工生产的特点之一是生产装置的规模和产量不断增大。产品生产规模的增大，可以更好地利用高新技术，充分合理利用原材料、能源等，达到降低成本、取得经济效益的目的。在 1950 到 1970 年间，石油化工产品和纤维产品几乎增长了十倍。合成氨和乙烯大型装置的发展就是一例。当然这种发展不是无限制的，但是可以肯定，新生产方法的装置规模必须比老方法的装置规模要大，这样才能显示其优越性。这表示，从实验室到工业生产装置间的放大倍数比以往要求更大。此外，为了加快工业化，要求尽可能地减少中间试验的级数，因此也就增大了放大倍数。以合成氨发展为例，从世界水平而言，20 世纪 50 年代建厂规模在 50 kt / 年，能耗约在 $75 \times 10^6 \text{ kJ} / \text{t}$ ；到 60 年代建厂规模达到 100kt / 年，能耗约为 $50 \times 10^6 \text{ kJ} / \text{t}$ ；到 70 年代，建厂规模达到 300kt / 年，能耗约为 $40 \times 10^6 \text{ kJ} / \text{t}$ 。目前，合成氨工业的发展已趋成熟，工艺先进性关键在于能否充分回收利用不同能级的能量，使产品能耗逼近理论值。国内大量的小化肥厂，曾为农业发展做出了一定的贡献，但能耗太大。70 年代引进的大型化肥装置和上海吴泾化工厂等国产大型设备建成投产，小化肥厂已开始逐步退出市场。

化工过程开发研究中，适时地进入放大研究，提供样品，积极开拓市场也是十分重要的。例如，集成电路生产用超纯水做表面清洗。集成电路的尺寸太小，以致水中微量污染物（如钠离子、氯离子、细菌等）被吸附进入电路的某些层内，都会改变装置的导电特性，从而影响最终产品的性能。利用新型反渗透设备生产超纯水，在小试产品达到要求后，就需及时的进行放大或试生产，向有关厂家提供样品，以确定产品

的应用性能，同时占领市场。

为了避免仅就实验室技术做出投资经营决策，许多企业在接受一项新产品或新技术前，往往要求技术方提供“大样”，以确定项目技术成熟性。放大包括从实验室走向工业化，也包括从小规模生产过渡到大规模生产。放大研究是在新的条件下，引入工程特征后进行的研究，要考虑许多在实验室规模无法考察的问题。要解决包括可靠的原料来源、物料储存和运输、循环使用、加热和冷却、产品精制、热量回收、三废处理等一系列问题。

1.4 化工过程开发基本方法

信息论、控制论、系统论提出的研究方法，对任何研究过程都具有指导意义。本节将讨论化工过程研究与开发基本方法。

化工过程的开发是从化学实验室成果开始，直至实现工业化的全部技术活动。一般来说，这一阶段需要经过小型试验和中间(工厂)试验等若干步骤，其中多层次的中间试验往往是一项耗资巨大、旷日持久的工作。采用科学的研究方法，减少中间试验的层次，缩小中间试验的规模，是化学工程师的一项重要任务。

化工过程开发所面临的实际问题往往非常复杂，主要表现是：化工过程涉及的物料种类众多，物性千变万化；过程进行的几何边界(如设备壁面、催化剂填充层中的孔道)十分复杂；动量传递、热量传递，质量传递和化学反应器多种形式同时存在，互相影响。

最基本的研究方法有实验研究方法和数学模型方法两类。

1.4.1 实验研究方法

长期以来，化工过程研究与开发较多地依赖于实验研究。但是，实验研究的结果往往只包含一些个别数据和个别规律，反映实验条件下各种现象及特点。为达到由此及彼，以小见大的目的，就需要有一套完整的理论和方法进行数据整理并加以推广应用，其中包括对安排实验时必然遇到的问题做出正确的回答。例如：在实验中要测量哪些物理量；如何整理实验数据以导出结果；实验结果的推广应用限于什么条件和范围。

实验研究方法有**量纲分析法和相似论方法**。这两种方法主要用于传递过程和单元操作的实验研究，都以无量纲数群的形式来表达实验结果，使实验工作大为简化，对化学工程学科的形成和发展有重大作用。

对某些复杂的化工过程，如果既不能利用量纲分析法和相似论方法来安排实验，也不能通过对过程的合理简化建立数学模型，往往只能求助于规模逐次放大的实验来搜索过程的规律，这种研究方法称为**经验放大**。在采用逐级的经验放大来开发化工过程时，通常首先进行小型的工艺试验，以确定优选的工艺条件，然后进行规模稍大的模型试验，验证小型试验的结果，再建立规模更大(如中间工厂规模)的装置。进行逐

级搜索，最后才能设计工业规模的大型生产装置。多层次的中间试验，每次放大倍数很低，显然是相当费时费钱的，但目前这种方法还不能完全排除。

1.4.2 数学模型方法

对于简单过程可根据对过程机理的了解，利用普遍适用的物理和化学原理，对过程进行数学描述，然后结合定解条件求解方程，以预测过程的结果，称为**解析法**。但是，对大多数实际化工过程是无法列出数学方程式的，因而应用有限。

首先对实际过程做出合理的简化，然后进行数学描述，再通过实验求取模型参数，并对模型的适用性进行验证，这种研究方法称为**数学模型方法**。数学模型方法用于过程的开发和放大时，其步骤为：（1）将过程分解成若干个子过程，如将反应过程分解为化学反应和各种传递过程；（2）分别研究各子过程的规律并建立数学模型，如反应动力学模型、流动模型、传热模型，传质模型等；（3）过程综合，或称计算机模拟，即通过数值计算联立求解各子过程的数学模型，以预测不同条件下大型装置的性能。目的是优化设计和优化操作。

进行过程分解的目的是：减少各子过程数学模型所包含的待定模型参数，以减少确定模型参数所需的实验工作量和提高求得的模型参数的可靠性；对于不同的子过程可以在不同类型的实验装置中进行研究。例如化学反应的规律不因设备尺寸而异，完全可以在小型装置中进行研究，物料流动和热量传递、质量传递规律一般随设备尺寸而变，因此有必要在大型装置中进行试验，但无需涉及化学反应，以节约资金和节省时间。为反应过程开发所进行的不带化学反应的大型实验，称为**冷模实验**。

用计算机进行数学模拟放大，这种方法是在充分利用现有的技术情报资料、化工数据、化学工程的理论和小试验结果的基础上整理成抽象的理论模型(初级模型)，然后在电子计算机上进行运算，经过与实验结果比较(一般要中试结果)，并反复对模型进行修正，若模型在一定的精度要求内能符合试验结果，则可以直接用于放大设计。采用数学模拟的优点是可以实现高倍数的放大，并且用数学模型在电子计算机上进行“试验”可大量节省人力、物力和时间。例如，石油加工中流化床催化裂化过程和丁苯橡胶的乳液聚合的开发，采用逐级放大的方法，放大倍数不超过 50 倍。但是在曼哈顿工程设计中（美国原子弹研制工程），根据化学工程的基础理论工作，如扩散分离过程，流体的流动，过滤速度和传热过程的研究，以及借鉴已有的工程技术经验，使工程放大高达千倍，有些装置的放大倍数甚至更高。曼哈顿工程设计的成功，极大的推动了在过程开发中数学模型的应用。

应指出的是数学模拟放大并不意味着不要中试。相反，在许多情况下，一个正确的数学模型往往要经过小试，中试，甚至通过工业生产的检验后才能完善地建立。

目前，化工过程的开发处于逐步从**经验过渡到科学**的过程。长期以来化学工业中采用传统的**相似模拟放大**。这种放大方法在电子计算技术尚未得到广泛应用时，对于如何合理组织试验，以及解决一些变量不多的物理过程的放大问题，确实起了一定的作用。但是对于复杂的化工过程，由于无法同时满足各种相互矛盾的相似条件，例如

对于化学反应器的放大，相似方法是无能为力的。化工过程的数学模型化和计算机的应用，使得化工过程的分析与合成有可能按**系统工程的理论**进行优化。数学模型方法放大，无疑是过程开发研究中的一个重要方向。由于化工过程的复杂性，当前在化工过程的开发中，还不能完全排斥经验或半经验放大的方法。重要的是通过实验设计，力求减少从实验室过渡到工业生产间的试验级数。

1.5 化工过程开发的主要步骤

化工过程开发的步骤，并没有固定的模式。对于具体的问题要进行具体的处理。在此介绍基本步骤。

1987 原化工部颁布的《化工新技术开发管理条例》中明确规定：化工开发研究“不包括基础研究和应用研究”，化工开发研究是在“应用基础研究、应用研究和各种科技信息的基础上，开展新技术的工艺条件、技术规范、工程放大、技术经济评价等方面的研究，取得化工生产装置设计、制造、建设、操作及销售所需的数据与资料，为实现新技术在工业生产中的应用提供技术服务”。开发研究主要包括过程研究及工程研究两个方面的工作。

化工过程开发的起点是化学实验（应用基础研究成果），成果为工程设计。工程设计一般由设计单位完成。研究、开发和设计联合，一条龙服务，建立交钥匙工程，是发展方向。原因在于实验室成果直接工业化，企业风险太大，研究者获利（转让费）较少；经过开发、完成工艺设计后转让技术，研究者获利（转让费）多，企业风险小。国外大企业集团设有科研机构，研究、开发和设计通常是一条龙服务。国内由于历史原因，科研机构与企业脱节，国家正在进行的经济体制改革，这种状况已明显好转。图 1—3 给出化工过程开发工作框图。

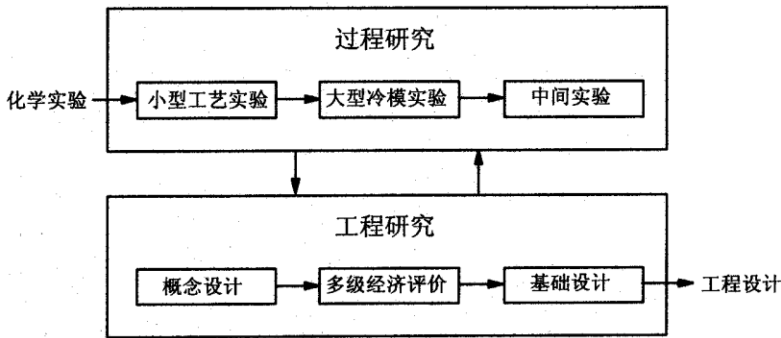


图1-3 化工过程开发工作框图

1.5.1 过程研究

过程研究是根据化学理论基础研究和应用研究以及其他信息形成的概念，有了工业化可能并经过讨论立项后进行的系统研究工作。它包括确定原料路线，掌握设备结

构特征,选择流程,确定基本工艺条件、催化剂性能、化学及化工热力学、化学反应动力学、传递过程规律及获得所需数据而进行的一系列实验。过程研究一般包含小型工艺实验、必要的大型冷模实验和中间实验三个环节。

(1) 小型工艺实验 小型工艺实验的目的是研究化学反应规律:①反应过程的特征:主反应是吸热还是放热,量级为多少;副反应是否存在,是串联还是并联,对主反应影响多大;②反应的影响因素:对于选定的反应器和催化剂,温度及温度分布、浓度及浓度分布等反应条件对反应结果的影响如何;③反应的特殊性:均相或拟均相;绝热或等温;反应控制或传递控制;高转化率或低转化率等。通过定量的研究,给出反应动力学。

在小型工艺实验中,研究人员要充分注重项目方案的创新性、先进性与实用性、经济性的关系,确保整个研究工作的连续进行。

(2) 大型冷模实验 如果化学工程理论及技术资料不能提供传递规律,常常通过大型冷模实验了解过程的传递规律。例如,宏观混合或微观混合;单相或多相体系;流场、温度场、浓度场。前已述及,传递规律与设备尺寸大小有关,所以冷模实验设计要有一定的规模。

(3) 中间实验 小型工艺实验获得化学反应动力学规律与大型冷模实验中提出的传递规律,在计算机上综合,即可建立反应器的数学模型。对可能存在几种方案,考虑工艺、工程、技术经济等多方面因素进行优选,并通过中间实验进行验证,进行结果评价,提出改进意见。

过程研究阶段要进行按规范的工艺条件、生产流程、设备结构、放大效应、控制方法、物料平衡、能量平衡、材质选择、三废处理、安全技术、长期运转、杂质影响、产品应用、市场开发及数学模型验证等方面的研究工作,取得基础设计所需整套数据,并对技术经济指标进行充分考核,解决工业化过程必须解决的一系列问题。

过程研究均是通过各种试验去认识、掌握化学反应和相关过程的规律,获得所需的各种工艺数据、指标,为工业化设计和多级经济评价提供信息和依据,因此,是通过实践活动认识自然规律的过程。

1.5.2 工程研究

工程研究含概念设计、多级经济评价、基础设计三个环节。

(1) 概念设计 以过程研究(或文献资料)中间结果或最终结果为基础,内容包括:过程合成,形成最佳工艺流程,给出物料流程图(Process Flow Diagram);进行物料与热量衡算;设备计算与辅助设备选型;确定单耗指标;确定三废处理方案;估算基建投资与产品成本等。

概念设计介于过程研究与多级经济评价之间,具有两方面的任务。其一,接受过程研究提供的数据与资料进行设计,如发现过程研究中有不足之处、以及有利于过程开发的工程经验应及时反馈,以提高过程研究成果质量。其二,为多级经济评价提供较为可靠的依据,主要包括投资、成本、利润、环境保护、项目建设难点(例如材料)等。

根据概念设计提供的素材,在多级经济评价(含社会效益、环保效益)环节,根据评价指标(返本期、投资回收率等)进行评估,如出现不利前景,则应及时终止开发。

(2) 基础设计 工程研究的最后环节,也是化工过程开发的成果形式,是完成工程设计的依据。包括:设计基础、工艺流程说明、物料流程图、带控制点管道流程图(Piping and Instrumentation Diagram)、设备名称表和设备规格说明书、工程设计的要求、设备布置图、装置操作说明、三废及处理、自控设计说明、消耗定额、有关技术资料、安全技术与劳动保护说明。其中最为关键的是生产规模,它涉及中试装置的放大倍数这一敏感问题。

工程研究是依赖研究人员和工程人员的知识、经验和思维,去再创造的过程,是根据对自然规律的认识去创造新的概念的工作。工程研究就是在不同研究阶段,不断发展某种设想,最终形成对一套工业装置的详细描述及其如何操作的相关信息,即开拓出一个工艺系统。

总之,在化工过程开发全过程中,工程研究与过程研究是经常交换信息,反复交替展开工作的。依据过程研究结果进行概念设计时,可能有一系列不同方案供选择;概念设计过程中缺乏数据时,反过来要求过程研究补充试验数据。概念设计提出的问题藉助过程研究(包括中试、冷模试验)得到解决并预测放大结果后,进入工程研究中的基础设计阶段,才能给出工程设计所需的信息。

过程研究不断发现并解决问题后,项目技术经济指标将有所变化,因此,将通过工程研究中的技术经济评价工作来判断开发工作各个阶段结果的有效程度以及项目是否适宜继续进行。技术经济评价达不到要求的项目,应及时的终止,以避免浪费。

1.5.3 化工过程开发中的组织与管理

在化学工业中,用于研究和开发的费用约占总销售额的5~10%。而其中实验室的研究费用不到1/4,其余部分均用于工业试验,即用于过程开发本身。过程开发所耗费的人力,物力是相当大的,因此必须科学合理地组织。

由于化工过程开发涉及面甚广,因此要求过程开发者除了掌握一定的数学、物理,化学、机械和材料等基础科学和工程技术知识外,尚须具有良好的化学工程理论素养,以及丰富的化工生产和设计的经验。应当指出,在过程开发中应尽可能地采用现有化工生产中或其他领域内的一切可以利用的成熟经验。

化工过程开发涉及化学基本原理、化学工程理论、化工机械与设备、自动控制、材料与防腐、技术经济等多个领域,需要情报、工艺、设备、技术经济评价多种专业人才的团结合作,团队精神十分重要。

化工技术、产品更新很快,更增加了化工过程开发风险。开发过程中需付出大量的创造性的劳动,承担了巨大的风险,相应的是能获得很多知识。知识就是“财富”。知识产权制度鼓励创造发明向社会公开,并保护创造发明人的“知识产权”。应于指出:一项成果要获得知识产权,需要符合相应知识产权法的条件,并履行一定的手续,才能受到保护。科技工作者要自觉地运用有关法规保护自己的创造发明成果。

1.6 开发案例

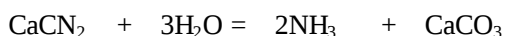
为了便于学生更好的了解从一个有关化学新产品、新工艺概念的形成，通过科学研究、工程放大、技术经济比较，直到设计付诸实施的全过程，在已学的基础知识和实际应用之间的渠道建立起清晰的概念，教材着重介绍研究与开发中涉及的共性问题，科学的选题、实验室研究、过程放大、技术经济评价、安全与环保、过程分析与合成、知识产权保护等内容，并简要介绍表述开发结果所必然涉及的工艺设计的基本知识。化学工业对人类生存环境有重要的影响，绿色化学与化工的简单介绍，以开阔眼界，拓展思路。下面通过一些开发案例加深读者对化工过程开发的理解。

1.6.1 合成氨发展史

氮因具有提供反应态氮的功能，是基本的化工原料。随着军工生产和农业生产的需要，20 世纪初开发并实现了氮的工业生产。合成氮的开发成功导致了化学工业的第一次飞跃，促进了化学工程学科的发展。回顾合成氮的发展史具有启迪和指导作用。

氮，是在 1754 年有普里斯特利（Priestley）在实验室中加热氯化铵和石灰时发现的。1784 年，伯托利（Bertholet）通过分析，确定了氮是由氮和氢组成的。其后，人们在实验室开始了氮的合成研究。

（1）氰化法 1898 年，德国的弗兰克（Flank）等人发现空气中的氮能被碳化钙固定，而生成氰化钙，进一步与过热蒸汽反应即可获得氮：



该法 1905 年投产，在第一次世界大战中满足了军工生产的需要，终因能耗过高，在 20 世纪 30 年代被淘汰。

（2）直接合成法 利用氮气和氢气直接合成氮的工业生产经历了艰辛的历程。从实验室研究到工业化生产，大约经历了 120 年。

1795 年希尔德布兰德（Hildebrand）在常压下用氮气和氢气进行合成氮的实验，此后相继采用催化剂、高温、高压、电弧等方法进行探索，终因缺乏理论指导，归于失败。此时，有人得出结论，氮气和氢气直接合成氮是不可能的。

随时间的推移，化学工程理论在化学热力学、化学动力学、催化剂等方面取得了巨大的进展，使得氮的合成反应能在理论的指导下有效的进行。

法国物理化学家吕 查得利（Le Chatelier）提出了化学平衡移动规律，认为高压有利与增加氮的产率。尽管在实验时，反应器最终发生爆炸，但他仍然得到了一项专利。

德国物理化学家哈伯（Haber）经过多年的研究，用铁为催化剂，在 17.5~20 MPa 和 500~600℃ 下，将氮气和氢气直接合成，反应器出口得到 6% 的氮，并建立了一套实验装置，氮的产量为 80g/h。在此研究中，哈伯提出了“平衡”和“可逆”两个概念；由于 转化率很低，他又提出将未参与反应的气体返回反应器的循环方法。1909 年，哈伯发表了他的研究成果，进行了流程设计，并获得了专利。至此，合成氮的实验室研究完成。哈伯于 1918 年获得诺贝尔化学奖。

德国巴登苯胺纯碱制造公司购买了哈伯的专利，在博施（Bosch）的领导下，进行合成氨的开发研究。合成氨的工业化进程困难重重。首先是金属稀缺，价格昂贵，必须寻找新的催化剂。他们进行了六千多次实验，测试了两千多个配方，终于合成了以少量钾、镁、铝、钙作为助剂的铁催化剂。其次是合成反应器材质问题：高温下氢腐蚀钢材，碳钢制反应器只有 80 小时的寿命，后采用微碳纯铁作衬里，解决了材质问题。另外，他们用水煤气作为氢气来源，用空气深冷分离提供氮，解决了工业规模原料气问题。三年的努力，完成了合成氨过程开发。1913 年，氮气和氢气直接合成氨厂建成投产，日产 30 吨氨。这种生产方法被称为哈伯—博施法。博施于 1931 年获得诺贝尔化学奖。

20 世纪 50 年代以后，新型催化剂的使用，合成原料的变化，装置的大型化，使合成氨工业发展很快。1966 年美国建成日产 1000 吨合成氨的单系列装置，目前已有日产 1500 吨合成氨的大型设备。在这个发展过程中，化工过程开发起了重要的作用。

回顾合成氨发展史，可从中得到启迪：①社会需要是推进研究与开发的巨大动力。合成氨的发展是迎合了农业生产大规模发展对肥料的需要。直接合成法的效益优于氰化法而取得了成功。②科学理论指导是开发研究成功的捷径，开发研究过程的深入思考推动了理论的发展。③放大是过程开发的核心。合成氨过程开发采用逐级经验放大法，逐步解决了一系列的工程问题。20 世纪后期装置的大型化则是采用数学模型放大方法。

1.6.2 包裹型符合肥料的研究与开发

郑州大学许秀成教授领导的磷肥研究室长期从事钙镁磷肥机理的研究。“钙镁磷肥采用玻璃结构因子配料方法”于 1983 年获国家发明四等奖。获奖后，迅速开展新产品的开发工作。

（1）科学选题 大量的调查与分析的结果发现，尿素等水溶性氮肥施入土壤后易被雨水冲洗造成挥发损失，用钙镁磷肥作为包裹层，将水溶性氮肥包裹起来，可以起到适度的缓效作用，所以确定包裹型符合肥料（简称包复肥）为研究方向。计算机查新表明，包复肥具有国际范围内的新颖性和巨大的市场潜力，值得进行研究与开发。

（2）实验室研究 实验室着重进行粘结剂的筛选和养分溶出机理模型的研究，并在 ϕ 400mm 的小型包裹机中进行包裹工艺条件的实验。采用单因素法，测定各种因素对包裹率及包裹肥料强度的影响。接着实验在 ϕ 1000mm 的小型包裹机中进行，（以投料量计算放大 20 倍），探索放大效应，并掌握操作诀窍。1987 年“包裹肥料及制造方法”获得国家专利。

（3）开发研究 1985 年与有关企业签定了技术开发合同，并且该项目被列入国家“七五”重点攻关计划。概念设计确定了工艺流程及主要设备，分析生产中可能出现的问题。通过实验筛选并确定了缓释剂和螯合剂，建立生产能力为 200kg/h 的连续模型实验装置（过程研究），考察和解决工程问题。继续放大至年产 5000 吨生产装置（中间实验），运行良好，经过比较、评价和优化，完成了年产 10000 吨包裹肥料的基础设计。1991 年“复合肥料包裹机”获得国家实用新型发明专利。

(4) 成果推广 1988 年成立了“乐喜施磷复肥技术推广中心”，经过努力，国内有 11 个企业采用该技术进行生产。以交钥匙工程方式在泰国承建了年产 50000 吨包复肥的工厂。公司的产品也出口进入国际市场。

许秀成教授在《化工新产品开发教程》一书中写到：“对人一片爱心，对事满腔热情，相信自己才能，勇敢发表见解”。这段话内涵丰富，值得认真体会。

回顾过去，二十世纪是化学工业蓬勃发展的世纪，合成肥料、农药的使用为粮食、蔬菜的大丰收奠定了基础；合成材料的应用遍及人类生活的各个方面；抗生素的发现、DNA 双螺旋结构的确定，基因工程的发展在预防疾病、减轻人类病痛方面起到了十分重要的作用。但是，化学工业快速发展对人类生存环境的破坏也是严重的，空气质量下降，江河水流的污染，臭氧层的破坏等，二十世纪也是人类逐步认识其危害性的世纪。展望二十一世纪，生物技术和生物药物、信息技术材料、纳米技术、高效洁净能源都会飞速发展，化学工业还担负着治理污染、保护生态环境，实现可持续发展的重任。新世纪的到来，知识经济时代的诸多挑战迎面扑来。科学技术要面向经济建设，开拓创新，缩短新技术发明从构思到工业化的时间，不断的将科技成果转化为生产力，推动经济和社会的发展。

小结：主要了解化工过程开发的内容、特点、方法和步骤，掌握一些基本观点：

(1) 实验室研究的结果是确定一种有希望的反应方法；化工过程开发的结果是实现工业化。

(2) 化工过程研究与开发的基本方法有实验研究方法和数学模型方法两类。数学模型方法放大是过程开发研究的方向。

(3) 化工过程开发包括过程研究及工程研究，研究中要经常交换信息，反复交替展开工作。

(4) 技术经济观点是十分重要的，但不是唯一的，必须考虑社会效益。

习题与思考

1-1. 化工过程开发的主要内容是什么？ 主要方法有那些？

1-2 化工过程开发的主要步骤是什么？ 哪个步骤最重要？

1-3 试述实验室研究与化工生产的主要不同点。

1-4 解释下列各组名词

化学工艺 与 化学工程；经验方法 与 数学模型；

过程研究 与 工程研究；概念设计 与 基础设计。

1-5 简述下列产品的发展过程：

(1) 塑料；(2) 橡胶；(3) 合成纤维；(4) 你感兴趣的化工产品。

1-6 包裹型符合肥料的研究与开发的过程给你哪些启示？

1-7. 举例说明：

- (1) 同一原料制取相同产品；
- (2) 不同原料生产相同产品；
- (3) 同一原料经过不同的加工路线制取相同产品。